

Use of enamine derivatives as ultraviolet-A filters - are more stable than current UV-A filters

Patent Number : EP-852137

International patents classification : A61K-007/40 A61K-007/42 C07C-057/00 C07C-255/04 C07C-409/22 C07D-221/02 A61K-007/00 A61K-007/06 A61K-007/48 A61K-031/13 A61K-031/235 A61K-031/24 A61K-031/255 A61K-031/275 A61K-031/33 A61K-031/425 A61K-031/66 C07C-022/00 C07C-211/49 C07C-217/54 C07C-217/84 C07C-219/34 C07C-229/24 C07C-229/48 C07D-209/04 C07D-307/02 C07D-333/24

• Abstract :

EP-852137 A Use of enamine derivatives of formula (R3)(R4NH)C=C(R1)(R2) (I) as UV filters in cosmetic and pharmaceutical preparations for protection of hair or skin against sun-radiation, alone or in combination with UV absorbers is new: R1 = COOR5, COR5, CONR5R6, CN, SO2R5, SO2OR5 or P(=O)OR7OR8; R2 = COOR6, COR6, CONR5R6, CN, SO2R6, SO2OR6 or P(=O)OR7OR8; R3 = H, or optionally substituted aliphatic, cycloaliphatic, arylaliphatic or aromatic residue with up to 18C; R4 = optionally substituted 5-12C aromatic or heteroaromatic residue; and R5, R6 = H or aliphatic, arylaliphatic, cycloaliphatic, or optionally substituted aromatic with up to 18C; or R3-R8 together with their bonded carbon atoms may form a 5-6 membered ring which may be further annelated.

USE - (I) are useful as UV-A filters (claimed).

ADVANTAGE - (I) show greater photostability than usual UV-A filters. (Dwg.0/0)

• Publication data :

Patent Family : EP-852137 A2 19980708 DW1998-31 A61K-007/42 Ger 53p * AP: 1997EP-0119397 19971106 DSR: AL AT BE CH DE DK ES FI FR GB GR IE IT LI LT LU LV MC MK NL PT RO SE SI

JP10158140 A 19980616 DW1998-34 A61K-007/42 58p AP:

1997JP-0328052 19971128

AU9745406 A 19980604 DW1998-39 C07C-057/00 AP:

1997AU-0045406 19971127

DE19712033 A1 19980924 DW1998-44 A61K-007/42

AP: 1997DE-1012033 19970321

BR9706035 A 19990518 DW1999-25 C07C-409/22 AP:

1997BR-0006035 19971127

US5945091 A 19990831 DW1999-42 A61K-007/42

AP: 1997US-0972391 19971118

MX9709075 A1 19980501 DW2000-07 A61K-007/42 AP:

1997MX-0009075 19971125

US6037487 A 20000314 DW2000-20 C07C-255/04 FD: Div ex

US5945091 AP: 1997US-0972391 19971118; 1999US-0266968

19990312

AU-745291 B 20020321 DW2002-33 A61K-007/42 FD:

Previous Publ. AU9745406 AP: 1997AU-0045406 19971127

US6407247 B1 20020618 DW2002-44 C07D-221/02 FD: Div ex

US5945091; Div ex US6037487 AP: 1997US-0972391 19971118;

1999US-0266968 19990312; 2000US-0494474 20000131

CN1183953 A 19980610 DW2002-54 A61K-007/40 AP:

1997CN-0123067 19971128

Priority n° : 1997DE-1012033 19970321; 1996DE-1049381

19961129

Covered countries : 30

Publications count : 11

• Patentee & Inventor(s) :

Patent assignee : (BADI) BASF AG

Inventor(s) : AUMULLER A; HABECK T; SCHEHLMANN V; WESTENFELDER H; WUNSCH T; AUMUELLER A; HAREMZA S; WUENSCH T

THIS PAGE BLANK (USPTO)



18 BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

Offenlegungsschrift

10 DE 197 12 033 A 1

51 Int. Cl.⁶:
A 61 K 7/42
A 61 K 31/235
A 61 K 31/425
A 61 K 31/275

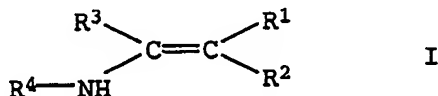
21 Aktenzeichen: 197 12 033.4
22 Anmeldetag: 21. 3. 97
43 Offenlegungstag: 24. 9. 98

DE 197 12 033 A 1

71 Anmelder:
BASF AG, 67063 Ludwigshafen, DE

72 Erfinder:
Habeck, Thorsten, Dr., 67149 Meckenheim, DE;
Aumüller, Alexander, Dr., 67435 Neustadt, DE;
Schehlmann, Volker, Dr., 67354 Römerberg, DE;
Westenfelder, Horst, 67435 Neustadt, DE; Wünsch,
Thomas, Dr., 67346 Speyer, DE; Haremza, Sylke, Dr.,
69151 Neckargemünd, DE

- 54 Photostabile UV-Filter enthaltende kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen
57 Verwendung von Verbindungen der Formel I



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und die Variablen folgende Bedeutung haben:

R¹ COOR⁵, COR⁵, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁵)=O, O=S(-OR⁵)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;

R² COOR⁶, COR⁶, CONR⁶R⁵, CN, O=S(-R⁶)=O, O=S(-OR⁶)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;

R³ Wasserstoff, einen gegebenenfalls substituierten aliphatischen, cycloaliphatischen, araliphatischen oder aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen;

R⁴ einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit 5 bis 12 Ringatomen; R⁵ bis

R⁸ unabhängig voneinander Wasserstoff, einen offenkettigen oder verzweigten aliphatischen, araliphatischen, cycloaliphatischen oder gegebenenfalls substituierten aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen, wobei die Variablen R³ bis R⁸ untereinander, jeweils zusammen mit den Kohlenstoffatomen, an die sie gebunden sind, gemeinsam einen 5- bis 6-Ring bilden können, der gegebenenfalls weiter anelliert sein kann, als UV-Filter in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Haut oder menschlicher Haare gegen Sonnenstrahlen, allein oder zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten, im UV-Bereich absorbierenden Verbindungen.

DE 197 12 033 A 1

Die Erfindung betrifft die Verwendung von Enaminderivaten als photostabile UV-Filter in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Epidermis oder menschliche Haare gegen UV-Strahlung, speziell im Bereich von 320 bis 400 nm.

Die in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen eingesetzten Lichtschutzmittel haben die Aufgabe, schädigende Einflüsse des Sonnenlichts auf die menschliche Haut zu verhindern oder zumindest in ihren Auswirkungen zu reduzieren. Daneben dienen diese Lichtschutzmittel aber auch dem Schutz weiterer Inhaltsstoffe vor Zerstörung oder Abbau durch UV-Strahlung. In haarkosmetischen Formulierungen soll eine Schädigung der Keratinfaser durch UV-Strahlen vermindert werden.

Das an die Erdoberfläche gelangende Sonnenlicht hat einen Anteil an UV-B- (280 bis 320 nm) und an UV-A-Strahlung (> 320 nm), welche sich direkt an den Bereich des sichtbaren Lichtes anschließen. Der Einfluß auf die menschliche Haut macht sich besonders bei der UV-B-Strahlung durch Sonnenbrand bemerkbar. Dementsprechend bietet die Industrie eine größere Zahl von Substanzen an, welche die UV-B-Strahlung absorbieren und damit den Sonnenbrand verhindern.

Nun haben dermatologische Untersuchungen gezeigt, daß auch die UV-A-Strahlung durchaus Hautschädigungen und Allergien hervorrufen kann, indem beispielsweise das Keratin oder Elastin geschädigt wird. Hierdurch werden Elastizität und Wasserspeichervermögen der Haut reduziert, d. h. die Haut wird weniger geschmeidig und neigt zur Faltenbildung. Die auffallend hohe Hautkrebshäufigkeit in Gegenden starker Sonneneinstrahlung zeigt, daß offenbar auch Schädigungen der Erbinformationen in den Zellen durch Sonnenlicht, speziell durch UV-A-Strahlung, hervorgerufen werden. All diese Erkenntnisse lassen daher die Entwicklung effizienter Filtersubstanzen für den UV-A-Bereich notwendig erscheinen.

Es besteht ein wachsender Bedarf an Lichtschutzmitteln für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen, die vor allem als UV-A-Filter dienen können und deren Absorptionsmaxima deshalb im Bereich von ca. 320 bis 380 nm liegen sollten. Um mit einer möglichst geringen Einsatzmenge die gewünschte Wirkung zu erzielen, sollten derartige Lichtschutzmittel zusätzlich eine hoch spezifische Extinktion aufweisen. Außerdem müssen Lichtschutzmittel für kosmetische Präparate noch eine Vielzahl weiterer Anforderungen erfüllen, beispielsweise gute Löslichkeit in kosmetischen Ölen, hohe Stabilität der mit ihnen hergestellten Emulsionen, toxikologische Unbedenklichkeit sowie geringen Eigengeruch und geringe Eigenfärbung.

Eine weitere Anforderung, der Lichtschutzmittel genügen müssen, ist eine ausreichende Photostabilität. Dies ist aber mit den bisher verfügbaren UV-A absorbierenden Lichtschutzmitteln nicht oder nur unzureichend gewährleistet.

In der französischen Patentschrift Nr. 2 440 933 wird das 4-(1,1-Dimethylethyl)-4'-methoxydibenzoylmethan als UV-A-Filter beschrieben. Es wird vorgeschlagen, diesen speziellen UV-A-Filter, der von der Firma GIVAUDAN unter der Bezeichnung "PAR-SOL 1789" verkauft wird, mit verschiedenen UV-B-Filtern zu kombinieren, um die gesamten UV-Strahlen mit einer Wellenlänge von 280 bis 380 nm zu absorbieren.

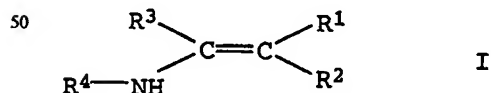
Dieser UV-A-Filter ist jedoch, wenn er allein oder in Kombination mit UV-B-Filtern verwendet wird, photochemisch nicht beständig genug, um einen anhaltenden Schutz der Haut während eines längeren Sonnenbades zu gewährleisten, was wiederholte Anwendungen in regelmäßigen und kurzen Abständen erfordert, wenn man einen wirksamen Schutz der Haut gegen die gesamten UV-Strahlen erzielen möchte.

Deshalb sollen gemäß EP 0514491 die nicht ausreichend photostabilen UV-A-Filter durch den Zusatz von 2-Cyan-3,3-diphenylacrylsäureestern stabilisiert werden, die selbst im UV-B-Bereich als Filter dienen.

Weiterhin wurde gemäß EP 251 398 schon vorgeschlagen, UV-A- und UV-B-Strahlung absorbierende Chromophore durch ein Bindeglied in einem Molekül zu vereinen. Dies hat den Nachteil, daß einerseits keine freie Kombination von UV-A- und UV-B-Filtern in der kosmetischen Zubereitung mehr möglich ist und daß Schwierigkeiten bei der chemischen Verknüpfung der Chromophore nur bestimmte Kombinationen zulassen.

Es bestand daher die Aufgabe, Lichtschutzmittel für kosmetische und pharmazeutische Zwecke vorzuschlagen, die im UV-A-Bereich mit hoher Extinktion absorbieren, die photostabil sind, eine geringe Eigenfarbe d. h. eine scharfe Bandenstruktur aufweise und je nach Substituent in Öl oder Wasser löslich sind.

Diese Aufgabe wurde erfindungsgemäß gelöst durch Verwendung von Verbindungen der Formel I



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt die Variablen folgende Bedeutung haben:

R^1 COOR⁵, COR⁵, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁵)=O, O=S(-OR⁵)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;
 R^2 COOR⁶, COR⁶, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁶)=O, O=S(-OR⁶)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;
 R^3 Wasserstoff, einen gegebenenfalls substituierten aliphatischen, cycloaliphatischen, araliphatischen oder aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen;

R^4 einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit 5 bis 12 Ringatomen;

R^5 bis R^8 unabhängig voneinander Wasserstoff, einen offenkettigen oder verzweigten aliphatischen, araliphatischen, cycloaliphatischen oder gegebenenfalls substituierten aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen, wobei die Variablen R^3 bis R^8 untereinander, jeweils zusammen mit den Kohlenstoffatomen, an die sie gebunden sind, gemeinsam einen 5- oder 6-Ring bilden können, der gegebenenfalls weiter anelliert sein kann, als UV-Filter, insbesondere UV-A-Filter, in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Haut oder menschlicher Haare gegen Sonnenstrahlen, allein oder zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten, im UV-Bereich absorbierenden Verbindungen.

Dabei sind solche Verbindungen der Formel I bevorzugt, in der R^3 für Wasserstoff, R^1 für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R^2 für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen, wobei R^5 und R^6 voneinander unabhängig offenkettige oder verzweigte aliphatische

sche oder gegebenenfalls substituierte, aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten.

Besonders bevorzugt ist die Verwendung von Verbindungen der Formel I, in der R³ für Wasserstoff, R¹ für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R² für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen, wobei R⁵ und R⁶ voneinander unabhängig offenkettige oder verzweigte aliphatische oder gegebenenfalls substituierte, aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten und R⁴ für einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit bis zu 10 C-Atomen im Ring, insbesondere einen substituierten Phenyl-, Thienyl-, Furyl-, Pyridyl-, Indolyl- oder Naphthylrest und besonders bevorzugt für einen gegebenenfalls substituierten Phenyl- oder Thienylrest steht.

Als Substituenten kommen sowohl lipophile als auch hydrophile Substituenten mit z. B. bis zu 20 C-Atomen in Betracht. Lipophile d. h. die Öllöslichkeit der Verbindungen der Formel I verstärkende Reste sind z. B. aliphatische oder cycloaliphatische Reste insbesondere Alkylreste mit 1 bis 18 C-Atomen, Alkoxy-, Mono- und Dialkylamino-, Alkoxy-carbonyl-, Mono- und Dialkylaminocarbonyl-, Mono- und Dialkylaminosulfonylreste, ferner Cyan-, Nitro-, Brom-, Chlor-, Iod- oder Fluorsubstituenten.

Hydrophile d. h. die Wasserlöslichkeit der Verbindungen der Formel I ermöglichende Reste sind z. B. Carboxy- und Sulfoxyreste und insbesondere deren Salze mit beliebigen physiologisch verträglichen Kationen, wie die Alkalisalze oder wie die Trialkylammoniumsalze, wie Tri-(hydroxyalkyl)-ammoniumsalze oder die 2-Methylpropan-1-ol-2-ammoniumsalze. Ferner kommen Alkylammoniumreste mit beliebigen physiologisch verträglichen Anionen in Betracht.

Als Alkoxyreste kommen solche mit 1 bis 12 C-Atomen, vorzugsweise mit 1 bis 8 C-Atomen in Betracht.

Beispielsweise sind zu nennen:

methoxy

n-propoxy-

n-butoxy-

2-methylpropoxy-

1,1-dimethylpropoxy-

hexoxy-

heptoxy-

2-ethylhexoxy-

isopropoxy-

1-methylpropoxy-

n-pentoxy-

3-methylbutoxy-

2,2-dimethylpropoxy-

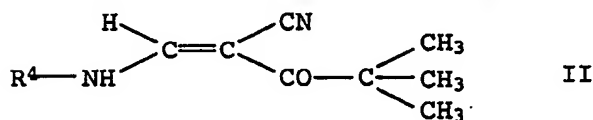
1-methyl-1-ethylpropoxy-

octoxy-

Als Mono- oder Dialkylaminoreste kommen z. B. solche in Betracht, die Alkylreste mit 1 bis 8 C-Atomen enthalten, wie Methyl-, n-Propyl-, n-Butyl-, 2-Methylpropyl-, 1,1-Dimethylpropyl-, Hexyl-, Heptyl-, 2-Ethylhexyl-, Isopropyl-, 1-Methylpropyl-, n-Pentyl-, 3-Methylbutyl-, 2,2-Dimethylpropyl-, 1-Methyl-1-ethylpropyl- und Octyl in Betracht. Diese Reste sind gleichermaßen in den Mono- und Dialkylaminocarbonyl- und Sulfonylresten enthalten.

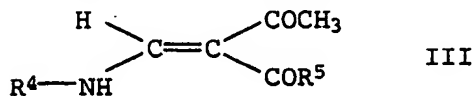
Alkoxy-carbonylreste sind z. B. Ester, die die oben genannten Alkoxyreste oder Reste von höheren Alkoholen z. B. mit bis zu 20 C-Atomen, wie iso-C₁₅-Alkohol, enthalten.

Die Erfindung betrifft auch die neuen Verbindungen der Formel II



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der gegebenenfalls durch einen oder mehrere Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonyl-, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen oder Cyan- oder Carboxyreste oder durch wasserlöslich machende Reste ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten substituiert ist. Solche Reste sind z. B. Alkalicarboxylat oder Carbonyloxy-tri-(hydroxyethyl)ammonium- oder Sulfonyloxy-tri-(hydroxyethyl)ammoniumreste.

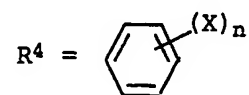
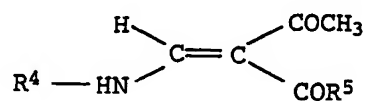
Weiterhin betrifft die Erfindung die neuen Verbindungen der Formel III,



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der gegebenenfalls durch einen oder mehrere Alkoxyreste mit bis zu 20 C-Atomen oder Alkoxy-carbonylreste mit 4 bis zu 20 C-Atomen, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert ist und R⁵ eine offenkettige, verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Alkoxyalkylgruppe mit jeweils bis zu 18 C-Atomen oder eine Aryloxygruppe bedeutet.

Beispielhaft sind in der folgenden Tabelle 1 die bevorzugten erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel III genannt.

Tabelle 1



X	R ⁵	n	Position
C ₃ H ₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₃ H ₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	CH ₃	1	para
C ₄ H ₉ OCO	CH ₃	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
10	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
15	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
20	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
25	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
30	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
35	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
40	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
45	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
50	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
55	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
60	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
65	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	1	para

X	R ⁵	n	Position	
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	5
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	para	
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	10
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	para	
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	15
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	para	
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	20
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	para	
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	25
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	para	
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta	30
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho	
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para	
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	35
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	40
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	45
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	50
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	55
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	60
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para	
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para	
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta	65
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho	

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
10	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
15	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
20	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
25	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
30	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
35	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
40	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
45	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
50	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
55	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
60	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
65	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
10	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
15	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
20	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
25	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	CH ₃ O	1	ortho
30	C ₃ H ₇ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	CH ₃ O	1	ortho
35	C ₄ H ₉ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃ O	1	ortho
40	C ₅ H ₁₁ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃ O	1	ortho
45	C ₆ H ₁₃ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃ O	1	ortho
50	C ₈ H ₁₇ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃ O	1	ortho
55	C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃ O	1	ortho
60	C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃ O	1	ortho
65	C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
10	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
15	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
20	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
25	C ₃ H ₇ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
30	C ₄ H ₉ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
35	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
40	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
45	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
50	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
55	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
60	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
65	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
10	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
15	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
20	C ₃ H ₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
25	C ₄ H ₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
30	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
35	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
40	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
45	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
50	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
55	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
60	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
65	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
10	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
15	C ₃ H ₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
20	C ₄ H ₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
25	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
30	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
35	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
40	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
45	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
50	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
55	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
60	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
65	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
10	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
15	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
20	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
25	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
30	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
35	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
40	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
45	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
50	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
55	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
60	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	1	ortho
65	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₂ H ₂₅ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
10	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
15	C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
20	C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
25	C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
30	C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
35	C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
40	C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
45	C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
50	C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
55	C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho
60	C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
65	C ₃ H ₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para

X	R ⁵	n.	Position
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
CH ₃ O	CH ₃	1	para
CH ₃ O	CH ₃	1	meta
CH ₃ O	CH ₃	1	ortho
CH ₃ O	CH ₃	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	para
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	meta
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	ortho

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₂ H ₅ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	CH ₃	1	para
	C ₃ H ₇ O	CH ₃	1	meta
	C ₃ H ₇ O	CH ₃	1	ortho
10	C ₃ H ₇ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	CH ₃	1	para
	C ₄ H ₉ O	CH ₃	1	meta
	C ₄ H ₉ O	CH ₃	1	ortho
15	C ₄ H ₉ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃	1	ortho
20	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	CH ₃	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	CH ₃	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	CH ₃	1	ortho
25	C ₆ H ₁₃ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	CH ₃	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	CH ₃	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	CH ₃	1	ortho
30	C ₈ H ₁₇ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃	1	ortho
35	C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃	1	ortho
40	C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃	1	ortho
45	C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃	1	ortho
50	C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃	1	ortho
55	C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃	1	ortho
60	C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃	1	ortho
65	C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₂ H ₅	1	para

X	R ⁵	n	Position
CH ₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
CH ₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
CH ₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
10	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₃ H ₇	1	para
	CH ₃ O	C ₃ H ₇	1	meta
	CH ₃ O	C ₃ H ₇	1	ortho
15	CH ₃ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇	1	ortho
20	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇	1	ortho
25	C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇	1	ortho
30	C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇	1	ortho
35	C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇	1	ortho
40	C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇	1	ortho
45	C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇	1	ortho
50	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇	1	ortho
55	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇	1	ortho
60	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇	1	ortho
65	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	para
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	meta
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	ortho
CH ₃ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉	1	ortho
10	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉	1	ortho
15	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉	1	ortho
20	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
25	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	CH ₃ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	CH ₃ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
30	CH ₃ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
35	C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
40	C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
45	C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
50	C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
55	C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
60	C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
65	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	1	para

X	R ⁵	n	Position	
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	5
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	para	
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	10
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	para	
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	15
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	para	
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	20
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	para	
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	25
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	para	
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta	30
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho	
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para	
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	35
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	40
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	45
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	50
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	55
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	60
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para	
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para	
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta	65
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho	

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
10	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
15	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
20	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
25	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
30	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
35	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
40	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
	CH ₃ O	CH ₃ O	1	para
	CH ₃ O	CH ₃ O	1	meta
	CH ₃ O	CH ₃ O	1	ortho
45	CH ₃ O	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	CH ₃ O	1	para
	C ₂ H ₅ O	CH ₃ O	1	meta
	C ₂ H ₅ O	CH ₃ O	1	ortho
50	C ₂ H ₅ O	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	CH ₃ O	1	para
	C ₃ H ₇ O	CH ₃ O	1	meta
	C ₃ H ₇ O	CH ₃ O	1	ortho
55	C ₃ H ₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	CH ₃ O	1	para
	C ₄ H ₉ O	CH ₃ O	1	meta
	C ₄ H ₉ O	CH ₃ O	1	ortho
60	C ₄ H ₉ O	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃ O	1	ortho
65	C ₅ H ₁₁ O	CH ₃ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	para
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
10	C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
15	C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
20	C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
25	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
30	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
35	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
40	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
45	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
50	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
55	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
	CH ₃ O	C ₃ H ₇ O	1	para
	CH ₃ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
60	CH ₃ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇ O	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
65	C ₂ H ₅ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	para
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
10	C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
15	C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
20	C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
25	C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
30	C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
35	C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
40	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
45	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
50	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
55	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
60	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
65	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

	X	R ⁵	n	Position
5	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
10	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
15	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	CH ₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	CH ₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
20	CH ₃ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
25	C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
30	C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
35	C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
40	C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
45	C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
50	C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
55	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
60	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
65	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

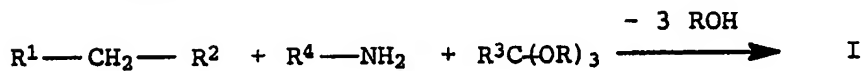
60

65

	X	R ^S	n	Position
5	C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
10	C ₁₄ H ₂₉ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
15	C ₁₅ H ₃₁ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
20	C ₁₆ H ₃₃ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
25	C ₁₇ H ₃₅ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
30	C ₁₈ H ₃₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
	CH ₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	CH ₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	CH ₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
35	CH ₃ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₂ H ₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₂ H ₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₂ H ₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
40	C ₂ H ₅ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₃ H ₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₃ H ₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₃ H ₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
45	C ₃ H ₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₄ H ₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₄ H ₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₄ H ₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
50	C ₄ H ₉ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₅ H ₁₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₅ H ₁₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
55	C ₅ H ₁₁ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₆ H ₁₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₆ H ₁₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
60	C ₆ H ₁₃ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
	C ₈ H ₁₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
	C ₈ H ₁₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
65	C ₈ H ₁₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
	C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para

X	R ⁵	n	Position
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para

Die erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindungen der Formel I bis III können nach der Gleichung



durch Kondensation hergestellt werden, wobei R¹ bis R⁴ die oben genannte Bedeutung haben.

Beispielsweise ergibt die Umsetzung von 2,4-Pentandion mit Anthranilsäure-2-ethylhexylester und Triethylorthoformiat die Verbindung 24 in Tabelle 2.

Die Lichtschutzmittel enthaltenden kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen sind in der Regel auf der Basis eines Trägers, der mindestens eine Ölphase enthält. Es sind aber auch Zubereitungen allein auf wäßriger Basis bei Verwendung von Verbindungen mit hydrophilen Substituenten möglich. Demgemäß kommen Öle, Öl-in-Wasser- und Wasser-in-Öl-Emulsionen, Cremes und Pasten, Lippschutzstiftmassen oder fettfreie Gele in Betracht.

Solche Sonnenschutzpräparate können demgemäß in flüssiger, pastöser oder fester Form vorliegen, beispielsweise als Wasser-in-Öl-Cremes, Öl-in-Wasser-Cremes und -Lotionen, Aerosol-Schaumcremes, Gele, Öle, Fettstifte, Puder, Sprays oder alkoholisch-wäßrige Lotionen.

Übliche Ölkomponenten in der Kosmetik sind beispielsweise Paraffinöl, Glycerylstearat, Isopropylmyristat, Diisopropyladipat, 2-Ethylhexansäurecetylstearylester, hydriertes Polyisobuten, Vaseline, Caprylsäure/Caprinsäure-Triglyceride, mikrokristallines Wachs, Lanolin und Stearinsäure.

Übliche kosmetische Hilfsstoffe, die als Zusätze in Betracht kommen können, sind z. B. Co-Emulgatoren, Fette und Wachse, Stabilisatoren, Verdickungsmittel, biogene Wirkstoffe, Filmbildner, Duftstoffe, Farbstoffe, Perlglanzmittel, Konservierungsmittel, Pigmente, Elektrolyte (z. B. Magnesiumsulfat) und pH-Regulatoren. Als Co-Emulgatoren kommen vorzugsweise bekannte W/O- und daneben auch O/W-Emulgatoren wie etwa Polyglycerinester, Sorbitanester oder teilveresterte Glyceride in Betracht. Typische Beispiele für Fette sind Glyceride; als Wachse sind u. a. Bienenwachs, Paraffinwachs oder Mikrowachse gegebenenfalls in Kombination mit hydrophilen Wachsen zu nennen. Als Stabilisatoren können Metallsalze von Fettsäuren wie z. B. Magnesium-, Aluminium- und/oder Zinkstearat eingesetzt werden. Geeig-

nete Verdickungsmittel sind beispielsweise vernetzte Polyacrylsäuren und deren Derivate, Polysaccharide, insbesondere Xanthan-Gum, Guar-Guar, Agar-Agar, Alginate und Tylosen, Carboxymethylcellulose und Hydroxyethylcellulose, ferner Fettalkohole, Monoglyceride und Fettsäuren, Polycrylate, Polyvinylalkohol und Polyvinylpyrrolidon. Unter biogenen Wirkstoffen sind beispielsweise Pflanzenextrakte, Eiweißhydrolysate und Vitaminkomplexe zu verstehen. Gebräuchliche Filmbildner sind beispielsweise Hydrocolloide wie Chitosan, mikrokristallines Chitosan oder quaternisiertes Chitosan, Polyvinylpyrrolidon, Vinylpyrrolidon-Vinylacetat-Copolymerisate, Polymere der Acrylsäurereihe, quaternäre Cellulose-Derivate und ähnliche Verbindungen. Als Konservierungsmittel eignen sich beispielsweise Formaldehydlösung, p-Hydroxybenzoat oder Sorbinsäure. Als Perlglanzmittel kommen beispielsweise Glycoldistearinsäureester wie Ethylenglycoldistearat, aber auch Fettsäuren und Fettsäuremonoglycolester in Betracht. Als Farbstoffe können die für kosmetische Zwecke geeigneten und zugelassenen Substanzen verwendet werden, wie sie beispielsweise in der Publikation "Kosmetische Färbemittel" der Farbstoffkommission der Deutschen Forschungsgemeinschaft, veröffentlicht im Verlag Chemie, Weinheim, 1984, zusammengestellt sind. Diese Farbstoffe werden üblicherweise in Konzentration von 0,001 bis 0,1 Gew.-%, bezogen auf die gesamte Mischung, eingesetzt.

Der Gesamtanteil der Hilfs- und Zusatzstoffe kann 1 bis 80, vorzugsweise 6 bis 40 Gew.-% und der nicht wäßrige Anteil ("Aktivsubstanz") 20 bis 80, vorzugsweise 30 bis 70 Gew.-% – bezogen auf die Mittel – betragen. Die Herstellung der Mittel kann in an sich bekannter Weise, d. h. beispielsweise durch Heiß-, Kalt-, Heiß-Heiß/Kalt- bzw. PIT-Emulgierung erfolgen. Hierbei handelt es sich um ein rein mechanisches Verfahren, eine chemische Reaktion findet nicht statt.

Schließlich können weitere an sich bekannte im UV-A-Bereich absorbierenden Substanzen mitverwendet werden, sofern sie im Gesamtsystem der erfindungsgemäß zu verwendenden Kombination aus UV-B und UV-A-Filter stabil sind.

Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind weiterhin kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen, die 0,1 bis 10 Gew.-%, vorzugsweise 1 bis 7 Gew.-%, bezogen auf die gesamte Menge der kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitung, eine oder mehrere der Verbindungen der Formel I zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten, im UV-B-Bereich absorbierenden Verbindungen als Lichtschutzmittel enthalten, wobei die Verbindungen der Formel I in der Regel in geringerer Menge als die UV-B-absorbierenden Verbindungen eingesetzt werden.

Der größte Teil der Lichtschutzmittel in den zum Schutz der menschlichen Epidermis dienenden kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen besteht aus Verbindungen, die UV-Licht im UV-B-Bereich absorbieren d. h. im Bereich von 280 bis 320 nm. Beispielsweise beträgt der Anteil der erfindungsgemäß zu verwendenden UV-A-Absorber 10 bis 90 Gew.-%, bevorzugt 20 bis 50 Gew.-% bezogen auf die Gesamtmenge von UV-B und UV-A-absorbierenden Substanzen.

Als UV-B-Filtersubstanzen, die in Kombination mit den erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindungen der Formel I angewandt werden, kommen beliebige UV-B-Filtersubstanzen in Betracht. Beispielsweise sind zu nennen:

Nr.	Stoff	CAS-Nr. (=Säure)	
1	4-Aminobenzoessäure	150-13-0	5
2	3-(4'-Trimethylammonium)-benzylidenbornan-2-on-methylsulfat	52793-97-2	
3	3,3,5-Trimethyl-cyclohexyl-salicylat (Homosalatum)	118-56-9	10
4	2-Hydroxy-4-methoxy-benzophenon (Oxybenzonum)	131-57-7	
5	2-Phenylbenzimidazol-5-sulfonsäure und ihre Kalium-, Natrium- u. Triethanolaminsalze	27503-81-7	15
6	3,3'-(1,4-Phenylendi- methin)-bis(7,7-dimethyl-2-oxobicyclo[2.2.1]hep- tan-1-methansulfonsäure) und ihre Salze	90457-82-2	20
7	4-Bis(polyethoxy)amino-benzoessäurepolyethoxy- ethylester	113010-52-9	
8	4-Dimethylamino-benzoessäure-2-ethylhexylester	21245-02-3	25
9	Salicylsäure-2-ethylhexylester	118-60-5	
10	4-Methoxy-zimtsäure-2-isoamylester	7/6/7-10-2	
11	4-Methoxy-zimtsäure-2-ethylhexylester	5466-77-3	30
12	2-Hydroxy-4-methoxy-benzophenon-5-sulfon- (Sulisobenzonum) und das Natriumsalz	4065-45-6	
13	3-(4'-Sulfo)benzyliden-bornan-2-on und Salze	58030-58-6	
14	3-(4'-Methyl)benzyliden-bornan-2-on	36861-47-9	35
15	3-Benzylidenbornan-2-on	16087-24-8	
16	1-(4'-Isopropylphenyl)-3-phenylpropan-1,3-dion	63260-25-9	
17	4-Isopropylbenzylsalicylat	94134-93-7	40
18	2,4,6-Triänilin-(o- carbo-2'-ethylhexyl-1'-oxy)-1,3,5-triazin	88122-99-0	
19	3-Imidazol-4-yl-acrylsäure und ihr Ethylester	104-98-3*	45
20	2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäureethylester	5232-99-5	
21	2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäure-2'-ethylhexyl- ester	6197-30-4	
22	Menthyl-o-aminobenzoate oder: 5-Methyl-2-(1-methylethyl)-2-aminobenzoate	134-09-8	50
23	Glyceryl p-aminobenzoat oder: 4-Aminobenzoessäure-1-glyceryl-ester	136-44-7	55
24	2,2'-Dihydroxy-4-methoxybenzophenon (Dioxyben- zone)	131-53-3	
25	2-Hydroxy-4-methoxy-4-methylbenzophenon (Mexo- non)	1641-17-4	60
26	Triethanolamin Salicylat	2174-16-5	
27	Dimethoxyphenylglyoxalsäure oder: 3,4-dimethoxy-phenyl-glyoxal-saures Natrium		
28	3-(4'Sulfo)benzyliden-bornan-2-on und seine Salze	56039-58-8	65

Schließlich sind auch mikronisierte Pigmente wie Titandioxid und Zinkoxid zu nennen.

Zum Schutz menschlicher Haare vor UV-Strahlen können die erfindungsgemäßen Lichtschutzmittel der Formel I in Shampoos, Lotionen, Gelen oder Emulsionen in Konzentrationen von 0,1 bis 10 Gew.-%, bevorzugt 1 bis 7 Gew.-% eingearbeitet werden. Die jeweiligen Formulierungen können dabei u. a. zum Waschen, Färben sowie zum Frisieren der

5 Haare verwendet werden.

Die erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindungen zeichnen sich in der Regel durch ein besonders hohes Absorptionsvermögen im Bereich der UV-A-Strahlung mit scharfer Bandenstruktur aus. Weiterhin sind sie gut in kosmetischen Ölen löslich und lassen sich leicht in kosmetische Formulierungen einarbeiten. Die mit den Verbindungen I hergestellten Emulsionen zeichnen sich besonders durch ihre hohe Stabilität, die Verbindungen I selber durch ihre hohe Photostabilität

10 aus, und die mit I hergestellten Zubereitungen durch ihr angenehmes Hautgefühl aus.

Gegenstand der Erfindung sind auch die Verbindungen der Formel I zur Verwendung als Medikament sowie pharmazeutische Mittel zur vorbeugenden Behandlung von Entzündungen und Allergien der Haut sowie zur Verhütung bestimmter Hautkrebsarten, welche eine wirksame Menge mindestens einer Verbindung der Formel I als Wirkstoff enthalten.

15 Das erfindungsgemäße pharmazeutische Mittel kann oral oder topisch verabreicht werden. Für die orale Verabreichung liegt das pharmazeutische Mittel in Form von u. a. Pastillen, Gelatinekapseln, Dragees, als Sirup, Lösung, Emulsion oder Suspension vor. Die topische Anwendung der pharmazeutischen Mittel erfolgt beispielsweise als Salbe, Creme, Gel, Spray, Lösung oder Lotion.

20 Beispiele

I. Herstellung

Beispiel 1

25

Allgemeine Vorschrift (für die Verbindung der Nr. 1 der Tabelle 2)

0,1 mol p-Aminobenzoesäure-2-ethylhexylester, 0,1 mol Pivaloylacetnitril und 0,1 mol Triethylorthoformiat wurden in 100 ml Diethylenglykol 2 h auf 120°C erhitzt, wobei Ethanol abdestilliert wurde. Nach Abkühlung auf 80°C wurde

30 mit Wasser versetzt und vom ausgefallenen Niederschlag abfiltriert. Anschließend wurde aus Petrolether umkristallisiert. Man erhielt in 80%iger Ausbeute Verbindung 1 der Tabelle 2.

Beispiel 2

35 0,1 mol Anthranilsäure-2-ethylhexylester, 0,1 mol 2,4-Pentandion und 0,1 mol Triethylorthoformiat wurden in 100 ml Diethylenglykol 2 h auf 120°C erhitzt, wobei Ethanol abdestilliert wurde. Nach Abkühlung auf 80°C wurde mit Wasser versetzt und vom ausgefallenen Niederschlag abfiltriert. Anschließend wurde aus Petrolether umkristallisiert. Man erhielt in 70%iger Ausbeute Verbindung 24 der Tabelle 2.

40 Beispiel 3

0,1 mol m-Toluidin, 0,1 mol Pivaloylacetnitril und 0,1 mol Triethylorthoformiat und 1 g Zinkchlorid wurden in 100 ml Diethylenglykol 2 h auf 120°C erhitzt, wobei Ethanol abdestilliert wurde. Nach Abkühlung auf 80°C wurde mit Wasser versetzt und vom ausgefallenen Niederschlag abfiltriert. Anschließend wurde aus Petrolether umkristallisiert.

45 Man erhielt in 70%iger Ausbeute Verbindung 2 der Tabelle 2.

Weitere so hergestellte Verbindungen sind in Tabelle 2 angegeben.

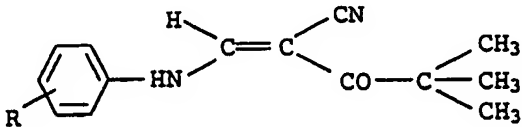
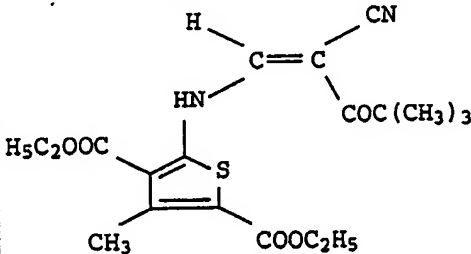
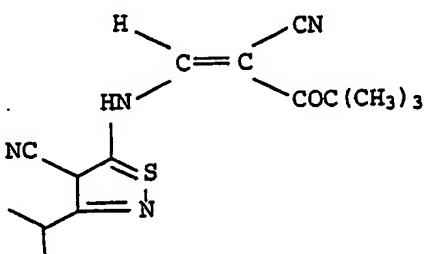
50

55

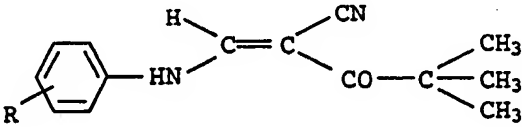
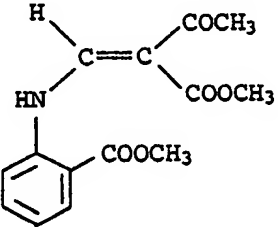
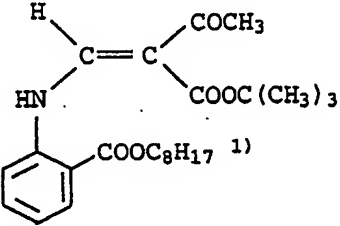
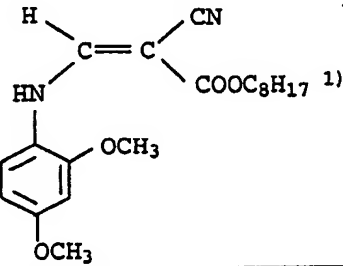
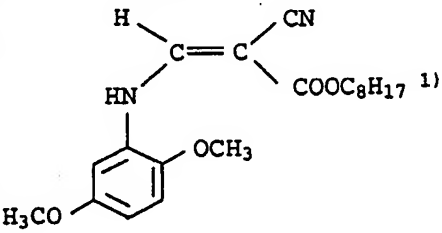
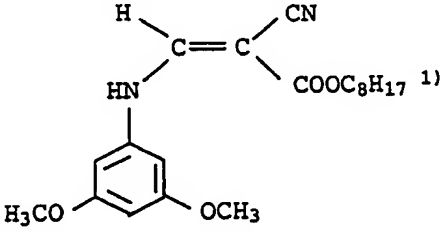
60

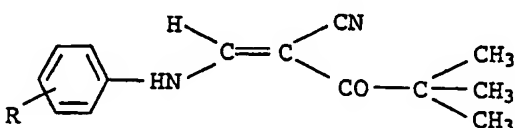
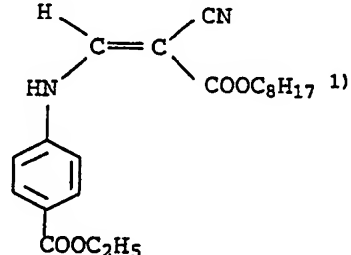
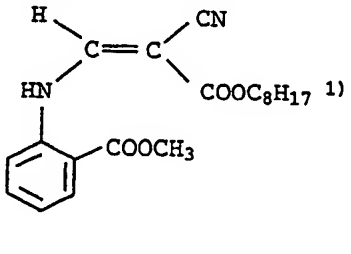
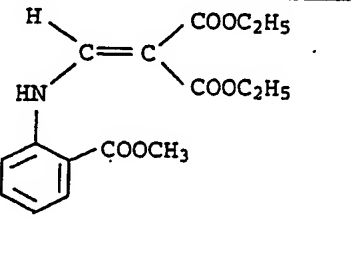
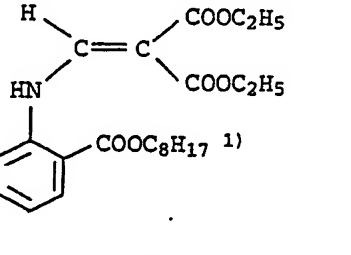
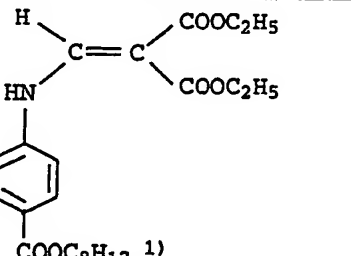
65

Tabelle 2

			
Nr.	R	λ_{\max}	ϵ^{11}
1)	4-COOC ₈ H ₁₇ ¹⁾	346	860
2)	3-CH ₃	338	978
3)	4-OCH ₃	348	841
4)	4-tert.C ₄ H ₉	342	888
5)	4-n.C ₄ H ₉	342	884
6)	4-CONHC ₈ H ₁₇ ¹⁾	346	773
7)	4-iso-C ₃ H ₇	342	903
8)	4-n-C ₃ H ₇	342	918
9)	2-COOC ₈ H ₁₇ ¹⁾	348	717
10)	2-CN	338	995
11)	2-COOC ₁₅ H ₃₁ (iso) (öl)	346	583
12)	3-iso OC ₃ H ₇	340	829
13)	2-COO [⊖] x N [⊕] H(C ₂ H ₄ OH) ₃	346	667 (Wasser)
14)	2,5-Di-OCH ₃	362	491
15)	2-COOH	346	965
16)	4-SO ₃ ⁻ x ⁺ HN(C ₂ H ₄ OH) ₃	340	666 (Wasser)
17)	4-SO ₃ ⁻ Na [⊕]	340	1010 (Wasser)
18)	2-OC ₂ H ₅	352	876
19)	2-COOCH ₃	348	995
20)	2-COOCH ₂ CH(CH ₃) ₂	348	864
21)	2-COOC ₄ H ₉	346	825
Nr.	Verbindung	λ_{\max}	ϵ^{11}
22)		380	768
23)		350	817

5				
10	Nr.	R	λ_{max}	E ¹ ₁
15	24)		344	795
20	25)		344	938
25	26)		336	1035
30	27)		346	1049
35	28)		346	757
40	29)		346	941

			
Nr.	R	λ_{\max}	E^{11}
30)		344	1008
31)		344	717
32)		346	646
33)		350	612
34)		322	761

			
Nr.	R	λ_{\max}	E^{11}
35)		332	1105
36)		336	752
37)		336	890
38)		335	630
39)		320	700

Nr.	R	λ_{max}	E^{11}
40)		358	743
41)		330	1191
42)		374	1175
43)		362	869
44)		336	896

1) C_8H_{17} = 2-Ethylhexyl

Allgemeine Herstellvorschrift zur Herstellung von Emulsionen für kosmetische Zwecke

Alle öllöslichen Bestandteile werden in einem Rührkessel auf 85°C erwärmt. Wenn alle Bestandteile geschmolzen sind, bzw. als Flüssigphase vorliegen, wird die Wasserphase unter Homogenisieren eingearbeitet. Unter Rühren wird die Emulsion auf ca. 40°C abgekühlt, parfümiert, homogenisiert und dann unter ständigem Rühren auf 25°C abgekühlt.

Zubereitungen

Beispiel 4

Zusammensetzung für die Lippenpflege

- ad 100 Eucerinum anhydricum
- 10,00 Glycerin
- 10,00 Titanium Dioxid
- 0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2
- 8,00 Octyl Methoxycinnamat
- 5,00 Zink Oxid
- 4,00 Castoröl
- 4,00 Pentaerythrithil Stearat/caprat/Caprylat Adipat
- 3,00 Glyceryl Stearat SE
- 2,00 Bienenwachs
- 2,00 Mikrokristallines Wachs
- 2,00 Quaternium-18 Bentonit
- 1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer

Beispiel 5

Zusammensetzung für die Lippenpflege

- ad 100 Eucerinum anhydricum
- 10,00 Glycerin
- 10,00 Titanium Dioxid
- 0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2
- 8,00 Octyl Methoxycinnamat
- 5,00 Zink Oxid
- 4,00 Castoröl
- 4,00 Pentaerythrithil Stearat/caprat/Caprylat Adipat
- 3,00 Glyceryl Stearat SE
- 2,00 Bienenwachs
- 2,00 Mikrokristallines Wachs
- 2,00 Quaternium-18 Bentonit
- 1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer

Beispiel 6

Zusammensetzung für Sunblocker mit Mikropigmenten

- ad 100 Wasser
- 10,00 Octyl Methoxycinnamat
- 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
- 6,00 Titanium Dioxid
- 0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2
- 5,00 Mineral Öl
- 5,00 Isoamyl p-Methoxycinnamat
- 5,00 Propylen Glycol
- 3,00 Jojoba Öl
- 3,00 4-Methylbenzyliden Campher
- 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
- 1,00 Dimethicon
- 0,50 PEG-40-Hydrogenated Castor Öl
- 0,50 Tocopheryl Acetat
- 0,50 Phenoxyethanol
- 0,20 EDTA

Beispiel 7

Zusammensetzung für Sunblocker mit Mikropigmenten

ad 100 Wasser	5
10,00 Octyl Methoxycinnamat	
6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl	
6,00 Titanium Dioxid	
0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
5,00 Mineral Öl	10
5,00 Isoamyl p-Methoxycinnamat	
5,00 Propylen Glycol	
3,00 Jojoba Öl	
3,00 4-Methylbenzyliden Campher	
2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer	15
1,00 Dimethicon	
0,50 PEG-40-Hydrogenated Castor Öl	
0,50 Tocopheryl Acetat	
0,50 Phenoxylethanol	
0,20 EDTA	20

Beispiel 8

Fettfreies Gel

ad 100 Wasser	25
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
7,00 Titanium Dioxid	
0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2	
5,00 Glycerin	30
5,00 PEG-25 PABA	
1,00 4-Methylbenzyliden Campher	
0,40 Acrylate C10–C30 Alkyl Acrylat Crosspolymer	
0,30 Imidazolidinyl Urea	
0,25 Hydroxyethyl Cellulose	35
0,25 Sodium Methylparaben	
0,20 Disodium EDTA	
0,15 Fragrance	
0,15 Sodium Propylparaben	
0,10 Sodium Hydroxid	40

Beispiel 9

Fettfreies Gel

ad 100 Wasser	45
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
7,00 Titanium Dioxid	
0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
5,00 Glycerin	50
5,00 PEG-25 PABA	
1,00 4-Methylbenzyliden Campher	
0,40 Acrylate C10–C30 Alkyl Acrylat Crosspolymer	
0,30 Imidazolidinyl Urea	
0,25 Hydroxyethyl Cellulose	55
0,25 Sodium Methylparaben	
0,20 Disodium EDTA	
0,15 Fragrance	
0,15 Sodium Propylparaben	
0,10 Sodium Hydroxid	60

Beispiel 10

Sonnencreme (LSF 20)

ad 100 Wasser	65
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
8,00 Titanium Dioxid	

- 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2
 6,00 Mineral Öl
 5,00 Zink Oxid
 5 5,00 Isopropyl Palmitat
 5,00 Imidazolidinyl Urea
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 1,00 4-Methylbenzyliden Campher
 10 0,60 Magnesium Stearat
 0,50 Tocopheryl Acetat
 0,25 Methylparaben
 0,20 Disodium EDTA
 0,15 Propylparaben
 15

Beispiel 11

- Sonnencreme (LSF 20)
 ad 100 Wasser
 20 8,00 Octyl Methoxycinnamat
 8,00 Titanium Dioxid
 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2
 6,00 Mineral Öl
 25 5,00 Zink Oxid
 5,00 Isopropyl Palmitat
 5,00 Imidazolidinyl Urea
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 30 1,00 4-Methylbenzyliden Campher
 0,60 Magnesium Stearat
 0,50 Tocopheryl Acetat
 0,25 Methylparaben
 0,20 Disodium EDTA
 35 0,15 Propylparaben

Beispiel 12

Sonnencreme wasserfest

- 40 ad 100 Wasser
 8,00 Octyl Methoxycinnamat
 5,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 5,00 Propylene Glycol
 45 4,00 Isopropyl Palmitat
 4,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2
 4,00 Glycerin
 3,00 Jojoba Öl
 50 2,00 4-Methylbenzyliden Campher
 2,00 Titanium Dioxid
 1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 1,50 Dimethicon
 0,70 Magnesium Sulfat
 55 0,50 Magnesium Stearat
 0,15 Fragrance

Beispiel 13

Sonnencreme wasserfest

- 60 ad 100 Wasser
 8,00 Octyl Methoxycinnamat
 5,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 65 5,00 Propylene Glycol
 4,00 Isopropyl Palmitat
 4,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2

4,00 Glycerin
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 4-Methylbenzyliden Campher
 2,00 Titanium Dioxid
 1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 1,50 Dimethicon
 0,70 Magnesium Sulfat
 0,50 Magnesium Stearat
 0,15 Fragrance

5

Beispiel 14

10

Sonnenmilch (LSF 6)

ad 100 Wasser
 10,00 Mineral Öl
 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 5,00 Isopropyl Palmitat
 3,50 Octyl Methoxycinnamat
 0,5–10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2
 3,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 0,70 Magnesium Sulfat
 0,60 Magnesium Stearat
 0,50 Tocopheryl Acetat
 0,30 Glycerin
 0,25 Methylparaben
 0,15 Propylparaben
 0,05 Tocopherol

15

20

25

30

Beispiel 15

Sonnenmilch (LSF 6)

35

ad 100 Wasser
 10,00 Mineral Öl
 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 5,00 Isopropyl Palmitat
 3,50 Octyl Methoxycinnamat
 0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2
 3,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 0,70 Magnesium Sulfat
 0,60 Magnesium Stearat
 0,50 Tocopheryl Acetat
 0,30 Glycerin
 0,25 Methylparaben
 0,15 Propylparaben
 0,05 Tocopherol

40

45

50

Beispiel 16

Sonnencreme wasserfest

55

ad 100 Wasser
 8,00 Octyl Methoxycinnamat
 5,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 5,00 Propylene Glycol
 4,00 Isopropyl Palmitat
 4,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 0,5–10 Verbindung Nr. 17 der Tabelle 2
 0,5–10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2
 4,00 Glycerin
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 4-Methylbenzyliden Campher
 2,00 Titanium Dioxid

60

65

- 1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 1,50 Dimethicon
 0,70 Magnesium Sulfat
 0,50 Magnesium Stearat
 5 0,15 Fragrance

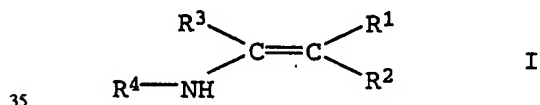
Beispiel 17

Sonnenmilch

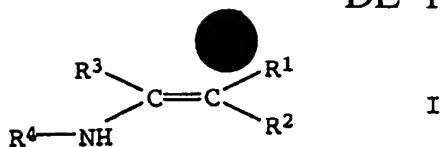
- 10 ad 100 Wasser
 10,00 Mineral Öl
 6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl
 5,00 Isopropyl Palmitat
 15 3,50 Octyl Methoxycinnamat
 0,5–10 Verbindung Nr. 17 der Tabelle 2
 3,00 Caprylic/Capric Triglycerid
 3,00 Jojoba Öl
 2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer
 20 0,70 Magnesium Sulfat
 0,60 Magnesium Stearat
 0,50 Tocopheryl Acetat
 0,30 Glycerin
 0,25 Methylparaben
 25 0,15 Propylparaben
 0,05 Tocopherol.

Patentansprüche

- 30 1. Verwendung von Verbindungen der Formel I



- in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und die Variablen folgende Bedeutung haben:
 R^1 COOR⁵, COR⁵, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁵)=O, O=S(-OR⁵)=O, R⁷O-P (-OR⁸)=O;
 R^2 COOR⁶, COR⁶, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁶)=O, O=S(-OR⁶)=O, R⁷O-P (-OR⁸)=O;
 40 R^3 Wasserstoff, einen gegebenenfalls substituierten aliphatischen, cycloaliphatischen, araliphatischen oder aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen;
 R^4 einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit 5 bis 12 Ringatomen;
 R^5 bis R^8 unabhängig voneinander Wasserstoff, einen offenkettigen oder verzweigten aliphatischen, araliphatischen, cycloaliphatischen oder gegebenenfalls substituierten aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen,
 45 wobei die Variablen R^3 bis R^8 untereinander, jeweils zusammen mit den Kohlenstoffatomen, an die sie gebunden sind, gemeinsam einen 5- oder 6-Ring bilden können, der gegebenenfalls weiter anelliert sein kann,
 als UV-Filter in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Haut oder menschlicher Haare gegen Sonnenstrahlen, allein oder zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten, im UV-Bereich absorbierenden Verbindungen.
 50 2. Verwendung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1 als UV-A-Filter.
 3. Verwendung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1, wobei R^3 für Wasserstoff, R^1 für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R^2 für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen, wobei R^5 und R^6 voneinander unabhängig offenkettige oder verzweigte aliphatische oder gegebenenfalls substituierte, aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten.
 4. Verwendung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1, wobei R^4 für gegebenenfalls durch hydrophile oder lipophile Substituenten substituiertes Phenyl steht.
 55 5. Verwendung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1, wobei R^4 für einen Alkoxyphenyl- oder Alkoxy-carbonylphenylrest steht.
 6. Verwendung von Verbindungen der Formel I gemäß Anspruch 1, wobei R^4 für einen Phenylrest steht, der was-serlöslich machende Substituenten trägt, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat, Sulfonat- oder Am-moniumresten.
 60 7. Lichtschutzmittel enthaltende kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Epidermis oder menschlichen Haare gegen UV-Licht im Bereich von 280 bis 400 nm, dadurch gekennzeichnet, daß sie in einem kosmetisch und pharmazeutisch geeigneten Träger, allein oder zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten im UV-Bereich absorbierenden Verbindungen, als photostabile UV-Filter wirksame Mengen von Verbindungen der Formel I



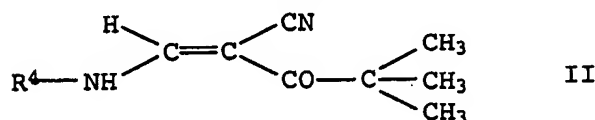
enthalten, in der die Variablen die Bedeutung gemäß Anspruch 1 haben.

8. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R³ für Wasserstoff, R¹ für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R² für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen, wobei R⁵ und R⁶ gegebenenfalls substituierte aliphatische oder aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten.

9. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R⁴ für gegebenenfalls durch hydrophile oder lipophile Substituenten substituiertes Phenyl steht.

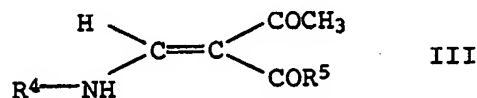
10. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R³ für Wasserstoff, R¹ für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R² für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen und R⁴ für einen Phenylrest steht, der durch Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonylreste, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen, oder mit Cyan- oder Carboxyresten, sowie mit wasserlöslich machenden Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann.

11. Neue Verbindungen der Formel II,



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der durch einen oder mehrere Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonylreste, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen oder Cyan- oder Carboxyreste, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann.

12. Neue Verbindungen der Formel III,



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der durch einen oder mehrere Alkoxyreste mit bis zu 20 C-Atomen oder Alkoxy-carbonylreste mit 4 bis zu 20 C-Atomen, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann und R⁵ eine offenkettige, verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy-, oder Alkoxyalkylgruppe mit jeweils bis zu 18 C-Atomen oder eine Aryloxygruppe bedeutet.

13. Verbindungen der Formel I zur Verwendung als Arzneimittel.

14. Pharmazeutische Zubereitung, dadurch gekennzeichnet, daß sie eine wirksame Menge mindestens einer der Verbindung der Formel I nach Anspruch 1 enthält.

- Leerseite -